



UNIVERSITÄT STUTTGART

INSTITUT FÜR THERMODYNAMIK UND WÄRMETECHNIK

Kommissarischer Leiter: apl. Prof. Dr.-Ing. Klaus Spindler

## **Modellierung von mechanischen Alterungs- mechanismen in Lithium-Ionen-Batterieelektroden**

Diplomarbeit Nr. 2013-5

cand.mach. Alexander Weller

Betreuer (ITW/DLR): Prof. Dr. K. Andreas Friedrich

Betreuer (Robert Bosch GmbH): Dipl.-Chem. Dipl.-Inform. Lothar Kunz

August 2013

## Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein 2D-Mikrostrukturmodell einer  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ -Elektrode entwickelt und in dem Finite-Elemente-Programmpaket COMSOL Multiphysics implementiert. Die Gefügestruktur wurde anhand eines REM-Bildes rekonstruiert und umfasst insgesamt 63 aktive Partikel, welche über leitfähige Binderelemente sowohl mechanisch als auch elektrisch miteinander in Kontakt stehen. Unter Anwendung dieses Multi-Partikel-Modells wurden aufeinander aufbauende Lade- und Entladezyklen simuliert und basierend auf den in der Elektrode entstehenden mechanischen Spannungen Mikrorisse in die aktiven Partikel und Binderelemente eingebracht sowie anschließend deren Einfluss auf den Abfall der Batteriekapazität analysiert. Es zeigte sich, dass die angewandte Methodik zur Rissmodellierung zu einem unrealistisch starken Abfall der Batteriekapazität führt. Für eine wirklichkeitsgetreue Abbildung der mechanischen Alterung wurde daraufhin eine Kopplung des Multi-Partikel-Modells mit einem Einzelpartikel-Modell zur Rissmodellierung untersucht. Dieser Ansatz zeigt vielversprechende erste Ergebnisse, weist jedoch noch einige Schwierigkeiten auf. So kommt es zum einen bei der Entstehung eines Risses, welcher das aktive Partikel in zwei Fragmente unterteilen würde, zu einem Abbruch der Berechnung des Einzelpartikel-Modells. Zum anderen weichen die durch beide Modelle berechneten Lithium-Konzentrationsverteilungen im Partikel in dem betrachteten Anwendungsfall noch bis zu 5% voneinander ab. Unabhängig von der Modellkopplung wurden mit dem Multi-Partikel-Modell des Weiteren noch die auf die  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ -Elektrode wirkenden Belastungen während eines 20s-Ladepulses untersucht. Diese theoretische Untersuchung wurde durchgeführt, da in experimentellen Versuchen des ZSW mit 1s-Ladepulsen nicht die gewünschte Wirkung einer beschleunigten mechanischen Alterung herbeigeführt werden konnte. Entsprechend der Simulationsergebnisse führt eine Verlängerung der Pulsdauer zu einer Erhöhung der Wahrscheinlichkeit von Rissbildungen.